低次元系のスピン波(基研短期研究会『統計物理の現状と展望』〜STATPHYS19に向けて〜,研究会報告)

高橋, 實

低次元系のスピン波

東大 物性研 高橋 實

§1・ はじめに

強磁性スピン波理論はBloch[1]によって始められ、Holstein、Primakoff[2]やDyson[3]の研究によってさらに発展した。反強磁性スピン波理論はAnderson[4]と久保[5]によって提案された。スピン波理論は通常長距離秩序が存在する三次元系の低温状態で良く成立ち、低次元系では成立しないであろうと考えられてきた。しかし一次元系ハイゼンベルグ強磁性体の低温での自由エネルギーをBethe仮説の方法で計算すると$T^{3/2}$に比例している。しかもその係数がスピン波理論の結果と良く一致する。この事から低次元系でも低温であればスピン波理論が成立している様に見える。[6] これがきっかけとなって我々は低次元強磁性ハイゼンベルグ系でのスピン波理論による系統的な計算を考案した。[7] 我々の方法では従来の理論で困難のあった赤外発散の問題を化学ポテンシャルを導入する事で解決し、スピン空間での回転非対称性を回転平均操作を使う事によって解決した。

この方法によれば二点相関関数、帯磁率、エネルギー等が計算できる。一次元系ではBethe仮説による低温での結果と大変良く一致し、また二次元では帯磁率、相関距離等の結果が繰り込み群の結果と同じく$\exp(A/T)$の形になることが導かれた。[7] 帯磁率や相関距離のような量は繰り込み群でなければ求められないと考えられていたのでこれはかなり意外であった。

我々の理論ではスピン空間での回転対称性を破っているのでArovasとAuer-bach[8] (AA)はShwinger Bosonの方法を使って理論を回転対称性のある形で再構築し、強磁性の場合及び反強磁性の場合を論じた。強磁性の場合は我々の理論を少し悪くした結果しか得られなかったが、反強磁性の場合に一組の方程式を導いた。この方程式は二次元正方格子では低温でかなり良い近似になっているらしく数値計算との比較がいろいろ発表されている。この解説では低次元系のスピン波理論をDysonハミルトニアン[3,9]に対する平均場近似として考え、強磁性及び反強磁性に対する平均場方程式を導出する。この方程式を使って比熱、エネルギー、相関関数等の物理量を計算する。我々の理論[10]ではAA理論での欠点をかなり克服できた様に思われる。

§2・強磁性の場合

ハミルトニアンは次のようになる。

$$H = -J\sum_{<ij>} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z, \quad S_i^2 = S(S+1), \quad [S_i^\alpha, S_i^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_i^\gamma. \tag{2.1}$$

この系の基底状態エネルギーは$-zJNS^2/2$となる事は良く知られている。素励起は次のようになる。

$$JSz(1-\gamma_k), \quad \gamma_k \equiv z^{-1}\sum_\delta e^{ik\delta}.$$

Nは格子上のスピンの数、zは最近接格子の数であり、δ は最近接格子への格子ベクトルである。これは厳密な結果であるがスピンが二個以上励起された場合は相互作用の問題が生じ、簡単でなくなる。ここで次に示すような Dyson-Maleev 変換を導入しよう。

$$S_j^- = b_j^\dagger, \quad S_j^+ = (2S - b_j^\dagger b_j)b_j, \quad S_j^z = S - b_j^\dagger b_j. \tag{2.2}$$

ここで b_j と $b_j^\dagger$ が通常のボーズ交換関係を満足すれば (2.1) のスピン交換関係は自動的に満足される。また (2.1) のハミルトニアンは次のようにかきかえられる。

$$H = -\frac{1}{2}zJS^2N - J\sum_{<i,j>}[S(b_i^\dagger - b_j^\dagger)(b_i - b_j) + \frac{1}{2}b_i^\dagger b_j^\dagger(b_i - b_j)^2]. \tag{2.3}$$

この式は Dyson ハミルトニアンと呼ばれる。このハミルトニアンの第一の特徴はエルミートでない事である ($H \neq H^\dagger$)。 このハミルトニアンは (2.1) と違って無限個の固有値と固有状態を持っている。しかし (2.1) の固有値と固有状態はすべて含まれていると考えられる。 スピン波理論の正しい基礎は Dyson ハミルトニアンから始めなければならないが、良く分かっていない事も多い。さらに (2.1) に含まれないような非物理的状態は基底状態より JS^2 のオーダーで上にあると考えられる。従って (2.3) のハミルトニアンは十分低温では正しい分配関数を与えるはずであるが、このままでは粒子数が無限大になってしまうので化学ポテンシャルを導入して粒子数がサイト当り S個になるようにしなければならない。ここで近似的に密度行列をつぎのような理想スピン波密度行列としよう。

$$\rho = \exp(-T^{-1}\sum_k \epsilon_k b_k^\dagger b_k), \quad b_k^\dagger \equiv \sqrt{\frac{1}{N}}\sum_r \exp(ikr)b_r^\dagger, \quad b_k \equiv \sqrt{\frac{1}{N}}\sum_r \exp(-ikr)b_r. \tag{2.4}$$

ここで kの和は第一 Brillouin ゾーンで行う事にする。この密度行列に対してスピン対 $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ の期待値は次のようになる。

$$< \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j >= (S - N^{-1}\sum_k[1 - \cos k(r_i - r_j)]n_k)^2, \quad n_k \equiv \frac{1}{\exp(\epsilon_k/T) - 1}. \tag{2.5}$$

$S_i^z S_j^z$ と $S_i^x S_j^x$ の期待値は回転対称性により同じになるはずであるが、密度行列 (2.4) を使うと同じにならない。そこで我々は

$$< S_i^z S_j^z >=< S_i^x S_j^x >= \frac{1}{3} < \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j >,$$

とする。これを回転平均化操作と呼ぼう。どんな演算子も回転平均化を行うとスピン対演算子 $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ の関数として書き表されると考えられる。(2.5) を使うと全エネルギーは

$$E = -\frac{1}{2}zJN(S - N^{-1}\sum_k(1 - \cos\delta r)n_k)^2,$$

で与えられる。一方エントロピーは

$$S = \sum_k (1+n_k)\ln(1+n_k) - n_k \ln n_k,$$

であり、$< S_i^z >$ は $S - N^{-1}\sum_k n_k$ である。我々は $E-TS$ が最小になるように、かつ $< S_i^z >= 0$ になるように ϵ_k を選ばなければならない。これより次の式が得られる。

$$S = N^{-1}\sum_k n_k, \quad S' = N^{-1}\sum_k \gamma_k n_k, \quad \epsilon_k = JzS'(1-\gamma_k) - \mu. \tag{2.6}$$

ここで μ はスピン波に対する化学ポテンシャルであり、通常のスピン波理論では外部磁場の強さに等しいと考えられている量である。ところで (2.1) の問題では外部磁場を零としているから、通常のスピン波理論では μ は零でなければならず、(2.6) の最初の式を満足しない。そこで我々の理論では μ は (2.6) によって決定すべきものであると考える。この方程式は S' と μ に対する自己無撞着方程式になっている。これに対する一つの解は

$$S' = E = 0, \quad \mu = -T\ln(1+S^{-1}), \quad \mathcal{S} = -F/T = N\ln[(1+S)(1+S^{-1})^S]. \tag{2.7}$$

高温ではこの解が自由エネルギーを最少にするが低温では $S' \neq 0$ の解が自由エネルギーを最少にする。 ある温度で一次相転移を起こすが、これは高温で近似が悪くなっているということで物理的意味はあまりない。二点相関関数は (2.5) を使って

$$< \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j >= (N^{-1}\sum_k \cos k(r_i - r_j) n_k)^2, \quad i \neq j$$

n_k は k が小さいとき $T/(JS'k^2 - \mu)$ なので相関距離は

$$\xi = \frac{1}{2}(\frac{JS'}{-\mu})^{1/2}, \tag{2.8}$$

である。

a) 一次元の場合、方程式 (2.6) は低温で展開できて

$$S' = S - O(t^{\frac{3}{2}}),$$

$$(-\mu/T)^{\frac{1}{2}} = (t^{\frac{1}{2}}/2S) + \pi^{-\frac{1}{2}}\zeta(\frac{1}{2})(t^{\frac{1}{2}}/2S)^2 + \pi^{-1}\zeta^2(\frac{1}{2})(t^{\frac{1}{2}}/2S)^3 + ..., \quad t \equiv T/JS. \tag{2.9}$$

ここで ζ は Riemann の ζ 関数である。$S = \frac{1}{2}$ の場合、これを使って一サイト当りの自由エネルギーと帯磁率は次のようになった。

$$f = T[-1.0421869(T/J)^{1/2} + (T/J) - O(T^{3/2})],$$

$$\chi = JT^{-2}[\frac{1}{6} + 0.5825974(T/J)^{1/2} + 0.6788396(T/J) + O(T^{3/2})]. \tag{2.10}$$

一方、山田と高橋[6]は Bethe 仮説を使った計算により

$$f = T[-1.042(T/J)^{1/2} + 1.00(T/J) - O(T^{3/2})],$$

$$\chi = JT^{-2}[0.1667 + 0.581(T/J)^{1/2} + 0.68(T/J) + O(T^{3/2})],$$

を得ている。最近高麗[11]は (2.10) にもっと良く一致する係数を得ている。但し f の第三項では、スピン波理論の結果と Bethe 仮説の結果は一致しない。この項については高次の摂動が必要であると考えられる。(2.8) と (2.9) を使うと $S = \frac{1}{2}$ の場合は相関距離は

$$\xi = 0.25(T/J)^{-1} + 0.291298727(T/J)^{-1/2} + O((T/J)^{1/2}), \tag{2.11}$$

となる。これに対し山田[12]の数値計算では

$$\xi = 0.250003(T/J)^{-1} + 0.2911(T/J)^{-1/2} + .0044 + O((T/J)^{1/2}), \tag{2.12}$$

を得ており，これも低温での一致が大変によい。
b) また二次元正方格子の場合は
$-\mu/T = \exp(-4\pi JS^2/T)$ となる。これは大変小さい量である。(2.8) により相関距離は

$$\xi = \sqrt{JS/T}\exp(2\pi JS^2/T), \tag{2.13}$$

となる。今までは相関距離のような物理量は繰り込み群でなければ求められないと思われていたが必ずしもそうではない。古典的二次元ハイゼンベルグ模型の場合についても我々のスピン波理論は適用できる。

この節で述べた方法は $S = 1/2$ の場合、温度が $0.2J$ ぐらいまでは良くなりたっているが、それ以上では急にうまくいかなくなる[13]。この辺からは非物理的状態への励起がさかんになり、近似を悪くしていると考えられる。

強磁性の問題の詳細については参考文献 14 を参照されたい。

§3・反強磁性の場合

この場合 (2.1) に対応してハミルトニアンは次のようになる。

$$H = J\sum_{<ij>} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z, \quad J > 0. \tag{3.1}$$

この場合も強磁性の場合と同じようにスピン波理論が適用できると考えられる。

しかし一次元系の場合は Haldane のギャップの問題があり、強磁性の場合に較べてかなり複雑である。近年は高温超伝導の問題と関連して正方格子の研究が盛んであるが、ここでは正方格子の場合を考える。　二つの副格子をAとBと呼ぼう。ここで我々は反強磁性的 Dyson-Maleev 変換を導入する。A 副格子で、

$$S_l^- = a_l^\dagger, S_l^+ = (2S - a_l^\dagger a_l)a_l, S_l^z = S - a_l^\dagger a_l,$$

B 副格子で、

$$S_m^- = -b_m, S_m^+ = -b_m^\dagger(2S - b_m^\dagger b_m), S_m^z = -S + b_m^\dagger b_m, \tag{3.2}$$

としよう。 この変換も (2.1) のスピン交換関係を満足する。この時ハミルトニアンは次のようになる。

$$H = -\frac{1}{2}zJS^2N + J\sum_{<i,j>}[S(a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j - a_i^\dagger b_j^\dagger - a_i b_j) + \frac{1}{2}a_i^\dagger(b_j^\dagger - a_i)^2 b_j]. \tag{3.3}$$

(2.4) に対応して Bogoliubov 変換を伴った理想スピン波密度行列を導入する。

$$\rho = \exp(-T^{-1}\sum_k \epsilon_k(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_{-k}^\dagger \beta_{-k})), \tag{3.4}$$

$$\alpha_k = \cosh\theta_k a_k - \sinh\theta_k b_{-k}^\dagger, \quad \beta_{-k}^\dagger = -\sinh\theta_k a_k + \cosh\theta_k b_{-k}^\dagger,$$

$$a_k \equiv \sqrt{2/N}\sum_{r\in A}\exp(-ikr)a_r, \quad b_{-k}^\dagger \equiv \sqrt{2/N}\sum_{r\in B}\exp(-ikr)b_r^\dagger. \tag{3.5}$$

ここで k は副格子上での Fourier 変換となり、$\sum_k$ は Brillouin zone の半分での和を表す。部分格子磁化を零になるようにして自由エネルギーを最小になるように θ_k と ϵ_k とを選べば次の方程式が導かれる。

$$\epsilon_k = \lambda\sqrt{1-\eta^2\gamma_k^2}, \quad \cosh 2\theta_k = 1/\sqrt{1-\eta^2\gamma_k^2}, \quad \sinh 2\theta_k = \eta\gamma_k/\sqrt{1-\eta^2\gamma_k^2}, \tag{3.6}$$

$$S + \frac{1}{2} = \frac{2}{N}\sum_k \cosh 2\theta_k(n_k + \frac{1}{2}), \tag{3.7a}$$

$$\frac{\eta\lambda}{Jz} = \frac{2}{N}\sum_k \sinh 2\theta_k(n_k + \frac{1}{2}), \tag{3.7b}$$

$$n_k \equiv \frac{1}{\exp(\epsilon_k/T) - 1}. \tag{3.8}$$

ここでは (2.6) 式の S' と μ のかわりに λ と η が未知数となる。 (2.7) に対応して $\eta = E = 0$ の解もあるが、これは高温での解である。この自己無撞着方程式は AA によっても得られている。二点相関関数は次のようになる。

$$< \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j >= f^2(r_i - r_j) - g^2(r_i - r_j) - \frac{1}{4}\delta_{ij},$$

$$f(r) \equiv \frac{2}{N}\sum_k e^{ikr}\cosh 2\theta_k(n_k + \frac{1}{2}), \quad g(r) \equiv \frac{2}{N}\sum_k e^{ikr}\sinh 2\theta_k(n_k + \frac{1}{2}). \tag{3.9}$$

AA の理論では、二点相関関数はこれの 3/2 倍になる。彼らはこの係数 3/2 はないほうがよい事に気ずいてはいたが、彼らの定式ではどうしてもそうなってしまう。

以下では二次元正方格子の場合を考えよう。a) $T=0$ においてηは $1-O(1/N)$ で、n_k は常に零である。(3.7a) より $k=0$ でのみ $\cosh 2\theta_k=(1-\eta^2)^{-1/2}=Nm_0$ で他の kでは $\cosh 2\theta_k=(1-\gamma_k^2)^{-1/2}$ と考えて良い。これより (3.9) を使って次の式を得る。

$$< \mathbf{S}_i\mathbf{S}_j > \simeq (-1)^{\mathbf{r}}(m_0+(\sqrt{2}\pi r)^{-1})^2,$$

$$m_0 \equiv S+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\int\frac{d^2k}{4\pi^2}\frac{1}{\sqrt{1-\gamma_k^2}}=S-0.19660. \tag{3.10}$$

ここでkについての積分領域は第一 Brillouin ゾーンの中である。 従って m_0 はこの系の自発磁化である。この結果は Reger と Young[15] による数値計算の結果と一致し、かつ Huse[16] によるスピン波の計算とも一致する。スピン波スペクトルは$\lambda=4Jm_1$なので

$$m_1 \equiv S+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\int\frac{d^2k}{4\pi^2}\sqrt{1-\gamma_k^2}=S+0.078974, \quad \epsilon_k=4Jm_1\sqrt{1-\gamma_k^2}, \tag{3.11}$$

で、スピン波の速度は $2\sqrt{2}Jm_1$ となる。
b) $T \ll J$ の場合、(3.7a) と (3.7a)-η(3.7b) より、

$$S+\frac{1}{2}=\frac{1}{2}\int_0^1(1-\eta^2x^2)^{-1/2}\coth(\frac{\lambda}{2T}\sqrt{1-\eta^2x^2})w(x)dx, \tag{3.12a}$$

$$S+\frac{1}{2}-\frac{\lambda\eta^2}{4J}=\frac{1}{2}\int_0^1(1-\eta^2x^2)^{1/2}\coth(\frac{\lambda}{2T}\sqrt{1-\eta^2x^2})w(x)dx, \tag{3.12b}$$

を得る。$w(x)\equiv(2/N)\sum_k\delta(x-\gamma_k)$ は状態密度関数であって $w(1)=2/\pi$である。この方程式は低温で

$$S+\frac{1}{2}=\frac{w(1)T}{\lambda}[\frac{1}{2\eta}\ln(\frac{1+\eta}{1-\eta})-\ln(\frac{2\lambda}{T})]+\frac{1}{2}\int_0^1(1-x^2)^{-1/2}w(x)dx+O(T^3), \tag{3.13a}$$

$$S+\frac{1}{2}-\frac{\lambda\eta^2}{4J}=\frac{1}{2}\int_0^1(1-x^2)^{1/2}w(x)dx+2w(1)\zeta(3)(t/\lambda)^3+O(T^5), \tag{3.13b}$$

と変形される。これを使って我々は

$$1-\eta=\frac{1}{2}(\frac{T}{4Jm_1})^2\exp(-4\pi Jm_0m_1/T)(1+O(T^2)),$$

$$\lambda=4J(m_1-\frac{4}{\pi}\zeta(3)(\frac{T}{4Jm_1})^3+O(T^5)),$$

を得る。原子一個当りのエネルギーは

$$E/N = -2J(m_1 - \frac{4}{\pi}\zeta(3)(\frac{T}{4Jm_1})^3 + O(T^5))^2, \tag{3.14}$$

となり、低温比熱は $3\zeta(3)T^2/(4\pi J^2 m_1^2)$ である。この結果は宮下[17]や岡部達[18]の結果と一致する。相関距離と帯磁率は

$$\xi = (8(\eta^{-2} - 1))^{1/2} = \frac{\sqrt{2}Jm_1}{T}\exp(\frac{2\pi Jm_0m_1}{T})(1 + O(T^2)), \tag{3.15a}$$

$$\chi = \frac{m_0}{12Jm_1} + \frac{T}{24\pi J^2 m_1^2} + O(T^3). \tag{3.15b}$$

この帯磁率は岡部達[18] の結果と大変よく一致する。(3.15b) を見ると $d\chi/dT \neq 0$ で、一見熱力学の第三法則と矛盾するようにも見える。この帯磁率は熱力学の第三法則を満足していないというより、$T = H = 0$ での自由エネルギーの特異な振舞いを示していると考えられる。

以上のようにして二次元正方格子の場合の基底状態は Neel 秩序を持つことがほとんど確定的になった。同様な理論は Hirsch と Tang 、大原と芳田によっても展開されている[19]。

ここで述べられた方法をフラストレートした正方格子反強磁性体や三角格子反強磁性体に適用することも行われている[20]。また強磁性体や反強磁性体の動的相関関数を計算することも行われている[21,22]。

参考文献

1) F. Bloch, Zeits. Phys. **61** 206 (1930).
2) T. Holstein and H. Primakkoff, Phys. Rev. **59** 1098 (1940).
3) F.J. Dyson, Phys. Rev. **102** 1217, 1230 (1956).
4) P.W. Anderson, Phys. Rev. **86** 694 (1952).
5) R. Kubo, Phys. Rev. **87** 568 (1952).
6) M. Takahashi and M. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. **54** 2808 (1985); M. Yamada and M. Takahashi, ibid **55** 2040 (1986).
7) M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. Suppl. **87** 233 (1986) ; Phys. Rev. Lett. **58** 168 (1987).
8) D.P. Arovas and A. Auerbach, Phys. Rev. **B38** 316 (1988) ; Phys. Rev. Lett. **61** 617 (1988).
9) S.V. Maleev, ZETF **30** 1010 (1957), JETP **6** 776 (1958); M. Takahashi, Jpn. Jrn. Apl. Phys. Suppl. **26-3** 869 (1987).
10) M. Takahashi, Phys. Rev. **B40** 2494 (1989), J. Phys. Soc. Jpn. **58** 1524 (1989).
11) T. Koma: Prog. Theor. Phys. **81** 783 (1989)
12) M. Yamada, Ph. D. Thesis (University of Tokyo, 1989); J. Phys. Soc. Jpn. **59** 848 (1990).
13) Y. Okabe and M. Kikuchi, J. Phys. Soc. Jpn. **57** 4351 (1988).
14) 高橋實、日本物理学会誌 **41** 336 (1986),**43** 128 (1988).
15) J.D. Reger and A.P.Young, Phys. Rev. **B37** 5478 (1988).

16) D.A. Huse, Phys. Rev. **B37** 2380 (1988).
17) S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **57** 1934 (1988).
18) Y. Okabe, M. Kikuchi and A.D.S. Nagi, Phys. Rev. Lett. **61** 2971 (1988).
19) J.E. Hirsch and S. Tang, Phys. Rev. **B40** 4769 (1989); K. Ohara and K. Yosida, J. Phys. Soc. Jpn. **58** 2521 (1989); S. Tang, M.E. Lazzouni and J.E. Hirsch, Phys. Rev. **B40** 5000 (1989).
20) H. Nishimori and Y. Saika, J. Phys. Soc. Jpn. **59** 4454 (1990); J.H. Xu and C.S. Ting, Phys. Rev. B **42** 6861 (1990); ibid. **43** 6177(1991).
21) M. Takahashi, Phys. Rev. B **42** 766(1990).
22) M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. Suppl. **101** 487 (1990).